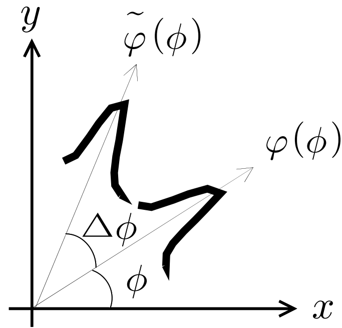
8.5 회전 생성원으로서 각운동량 연산자
(Angular Momentum Operator as Rotation Generator)

4장에서 우리는 운동량 연산자가 평행이동의 생성원으로 해밀토니안 연산자가 시간변화의 생성원으로 역할하는 것을 보았다. 여기에서는 각운동량 연산자의 역할에 대해서 알아보도록 하겠다.
이를 위해서 계를 z-축에 대하여 $\Delta\phi$ 만큼 무한소 회전(infinitesimal rotation) 하였을 때 상태함수의 변화에 대하여 생각하여 보자.



그림[8.5] 계를 z-축에 대하여 $\Delta\phi$ 만큼 회전하였을 때 상태함수의 변화

여기서 원래 상태함수를 $\varphi(\phi)$ 라고 하고 계를 z-축에 대하여 $\Delta\phi$ 만큼 회전한 후의 상태함수를 $\tilde{\varphi}(\phi)$ 로 표시하면 우리는 다음 관계가 성립함을 알 수 있다.

$$\tilde{\varphi}(\phi) = \varphi(\phi - \Delta\phi)$$

그런데 $\varphi(\phi-\Delta\phi)$를 테일러 전개하면 다음과 같이 되므로

$$\varphi(\phi-\Delta\phi) = \varphi(\phi) - \Delta\phi\frac{d\varphi}{d\phi} + O((\Delta\phi)^2)$$

z-성분 궤도 각운동량의 좌표표현이 $L_Z = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{d\phi}$ 임을 쓰면 회전 후의 상태는 다음과 같이 쓰여짐을 알 수 있다.

$$\tilde{\varphi}(\phi) = (1 - \frac{i}{\hbar}\Delta\phi\, L_z)\,\varphi(\phi) + O((\Delta\phi)^2) \;\cong e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\phi\, L_z}\varphi(\phi)$$

한편 회전 후의 상태 $\tilde{\varphi}(\phi)$ 는 원래 상태 $\varphi(\phi)$ 에 회전 연산자가 작용하여 생긴 상태로 생각할 수 있으므로 z-축에 대하여 계를 $\Delta\phi$ 만큼 회전시키는 회전 연산자를 $R_z(\Delta\phi)$ 로 표시하면 회전 후의 상태 $\tilde{\varphi}(\phi)$ 는 다음과 같이 표현할 수 있을 것이며,

$$\tilde{\varphi}(\phi) = R_z(\Delta\phi)\,\varphi(\phi)$$

이때 회전 연산자 $R_z(\Delta\phi)$ 는 다음과 같이 주어진다.

$$R_z(\Delta\phi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta\phi\, L_z}$$

이는 4장에서 우리가 본 x-방향으로 $\triangle x$ 만큼 평행이동시키는 평행이동 연산자가 x-성분 운동량 p_x 로 다음과 같이 표현되었음을 상기하면

$$\mathfrak{J}(\triangle x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\triangle x\, p_x}$$

그 형태가 서로 똑같음을 알 수 있다. 그러므로 앞에서 p_x 가 x-방향의 평행이동 변환을 일으키는 생성원(translation generator)이었듯이, z-성분 각운동량 연산자 L_z 는 z-축에 대한 회전 변환을 일으키는 생성원(rotation generator) 임을 알 수 있다.

회전각이 유한한 경우는 다음과 같이 회전 연산자를 얻을 수 있다. 먼저 $\triangle\phi = \phi/N$ 로 놓고 N을 무한대로 보내면 $R_z(\triangle\phi)$ 는 무한소 회전 연산자에 해당하므로 이를 N번 반복하여 유한한 각도의 회전 연산자 $R_z(\phi)$ 를 얻는다.

$$R_z(\phi) = \lim_{N\to\infty}\left[\prod^{N} R_z(\triangle\phi)\right] = \lim_{N\to\infty}\left[(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\phi}{N}L_z)\right]^N = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\phi L_z\right]$$

이제까지는 논의의 편의를 위하여 z-축에 대한 회전을 고려하였지만, 이는 우리가 임의의 방향을 z-축으로 생각하여도 무방하므로 x-축이나 y-축의 경우에도 동일하게 성립한다. 즉 L_x , L_y 는 각각 x-축, y-축에 대한 회전 변환을 일으키는 생성원이 된다. 그러므로 $\hat{n}$ 벡터로 표시되는 임의의 축에 대하여 각도 θ만큼 회전시키는 회전 연산자는 $R_{\hat{n}}(\theta)$ 는 다음과 같이 표시된다.

$$R_{\hat{n}}(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\vec{L}\,\theta} = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(n_x L_x + n_y L_y + n_z L_z)}$$

여기서 회전축의 방향을 나타내는 단위벡터 $\hat{n}$ 은 $\hat{n} = \hat{i}\, n_x + \hat{j}\, n_y + \hat{k} n_z$ 로 주어진다.

회전 변환의 생성원이 각운동량 연산자라고 하면, 이제 이러한 개념으로부터 각운동량 연산자들 사이의 교환관계식이 나올 수 있는지 한번 생각해보자. 역학에서 회전 변환은 회전행렬로 표시된다. 잘 알다시피 z-축을 중심으로, 그리고 x-축, y-축을 중심으로 각각 ϕ 만큼 회전하였을 때의 회전행렬은 각각 다음과 같다.

$$R_z = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},\ R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\phi & -\sin\phi \\ 0 & \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix},\ R_y = \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix}$$

여기서 우리는 회전들의 곱은 역시 회전으로 표시될 수 있음에 주의하여 그 순서를 뒤바꿀 경우의 차이에 대해서 생각해보겠다. 먼저 y-축을 중심으로 ϕ만큼 회전한 후 x-축을 중심으로 ψ만큼 회전하는 경우와 그 반대로 x-축을 중심으로 ψ만큼 회전하고 나중에 y-축을 중심으로 ϕ만큼 회전하는 경우 두 경우의 합성 회전행렬은 서로 같지 않으며 각각 다음과 같이 주어진다.

$$R_x(\psi)R_y(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\psi & -\sin\psi \\ 0 & \sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & 0 & \sin\phi \\ \sin\psi\sin\phi & \cos\psi & -\sin\psi\cos\phi \\ -\cos\psi\sin\phi & \sin\psi & \cos\psi\cos\phi \end{pmatrix}$$

$$R_y(\phi)R_x(\psi)=\begin{pmatrix}\cos\phi & 0 & \sin\phi\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\phi & 0 & \cos\phi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\psi & -\sin\psi\\ 0 & \sin\psi & \cos\psi\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\phi & \sin\phi\sin\psi & \sin\phi\cos\psi\\ 0 & \cos\psi & -\sin\psi\\ -\sin\phi & \cos\phi\sin\psi & \cos\phi\cos\psi\end{pmatrix}$$

이제 두 합성 회전행렬의 차이는 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$R_x(\psi)R_y(\phi)-R_y(\phi)R_x(\psi)$$

$$=\begin{pmatrix}0 & -\sin\phi\sin\psi & \sin\phi(1-\cos\psi)\\ \sin\psi\sin\phi & 0 & \sin\psi(1-\cos\phi)\\ \sin\phi(1-\cos\psi) & \sin\psi(1-\cos\phi) & 0\end{pmatrix}$$

여기서 회전각 ϕ와 ψ가 모두 무한소 각 ϵ만큼 작다고 하면

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon)-R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)=\begin{pmatrix}0 & -\epsilon^2 & 0\\ \epsilon^2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}+O(\epsilon^3)$$

이 되고, z-축을 중심으로 무한소 각 ϵ^2만큼 회전하면 회전행렬은 다음과 같으므로

$$R_z(\epsilon^2)=\begin{pmatrix}1 & -\epsilon^2 & 0\\ \epsilon^2 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}+O(\epsilon^4)$$

이상의 결과에서 우리는 무한소 회전의 경우 다음의 관계를 얻는다.

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon)-R_y(\epsilon)R_x(\epsilon)=R_z(\epsilon^2)-1+O(\epsilon^3)$$

이때 1은 단위행렬을 뜻한다. 한편, k번째 좌표축에 대한 무한소 회전연산자를 k번째 성분의 각운동량 연산자로 다음과 같이 표시하면,

$$R_k(\epsilon)=(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon J_k)$$

위의 관계식은 다음과 같이 쓸 수 있고,

$$(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon J_x)(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon J_y)-(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon J_y)(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon J_x)=(1-\frac{i}{\hbar}\epsilon^2 J_z)-1+O(\epsilon^3)$$

ϵ^3항은 무시할 수 있으므로 우리는 각운동량 연산자들 사이의 다음 관계식을 얻는다.

$$J_xJ_y-J_yJ_x=i\hbar J_z$$

이는 우리가 앞에서 구한 각운동량 연산자들 사이의 교환관계식이며, 나머지 교환관계식들도 동일한 방식으로 얻을 수 있다. 스핀 각운동량 연산자의 경우 공간좌표로 표현할 수는 없지만, 스핀 각운동량 연산자들도 위와 동일한 교환관계식을 만족하므로 스핀 각운동량 연산자도 회전 변환을 일으키는 생성원의 조건을 만족함을 알 수 있다. 그러므로 앞에서 우리가 얻은 임의의 축 $\hat{n}$에 대하여 θ만큼 회전시키는 회전 연산자 $R_{\hat{n}}(\theta)$는 다음과 같이 일반화하여 쓸 수 있다.

$$R_{\hat{n}}(\theta)=e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\vec{J}\theta}=e^{-\frac{i}{\hbar}\theta(n_xJ_x+n_yJ_y+n_zJ_z)},\qquad \vec{J}=\vec{L}+\vec{S}$$

스핀 각운동량 연산자가 회전 생성원일 때 이를 공간좌표로 표현할 수는 없지만 회전에 따른 스핀 각운동량 연산자의 기댓값의 변화를 계산하여 그 특성을 살펴보도록 하자. 이를 위하여 z-축을 중심으로 $\Delta\phi$만큼 회전하였을 때 x-성분 스핀 각운동량 연산자의 기댓

값의 변화를 구하여보자. 회전하기 전 상태 φ 에 대한 기댓값은 다음과 같이 쓸 수 있을 것이다.

$$\langle S_x \rangle_{\varphi} = \langle \varphi | S_x | \varphi \rangle$$

회전 변환 후 상태 $\widetilde{\varphi}$ 에 대한 기댓값은 다음과 같이 될 것이다.

$$\langle S_x \rangle_{\widetilde{\varphi}} = \langle \widetilde{\varphi} | S_x | \widetilde{\varphi} \rangle = \langle R_z \varphi | S_x | R_z \varphi \rangle$$

여기서 회전 변환에 의한 상태 변화는 다음과 같음을 이용하였다.

$$| \widetilde{\varphi}(\phi) > \; = R_z(\triangle\phi) \, | \varphi(\phi) > \; = e^{-\frac{i}{\hbar} \triangle\phi \, S_z} \, | \varphi(\phi) >$$

그러므로 회전 후 기댓값은 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\langle S_x \rangle_{\widetilde{\varphi}} = \langle \varphi | R_z^{\dagger} S_x R_z | \varphi \rangle \equiv \langle \widetilde{S_x} \rangle_{\varphi}$$

여기서 $\widetilde{S_x} \equiv R_z^{\dagger}(\triangle\phi) S_x R_z(\triangle\phi)$ 로 정의하였다. 이 변환된 스핀 각운동량 연산자 $\widetilde{S_x}$ 를 베이커-하우스도르프 공식 (Baker-Hausdorff Lemma)

$$e^{i\lambda G} A e^{-i\lambda G} = A + i\lambda [G, A] + \frac{1}{2!}(i\lambda)^2 [G, [G, A]] + \cdots + \frac{1}{n!}(i\lambda)^n [G, [G, \cdots [G, A] \cdots]]$$

을 사용하여 계산하겠다. 위 공식에서 G, A 는 연산자들이므로 순서를 바꾸어서 적용하지 않도록 주의하여야 한다.

$$\widetilde{S_x} = e^{\frac{i}{\hbar}\triangle\phi S_z} S_x \, e^{-\frac{i}{\hbar}\triangle\phi S_z} = S_x + i \frac{\triangle\phi}{\hbar} [S_z, S_x] + \frac{1}{2!} (\frac{i\triangle\phi}{\hbar})^2 [S_z, [S_z, S_x]] + \cdots$$

$$= S_x (1 - \frac{1}{2!}(\triangle\phi)^2 + \frac{1}{4!}(\triangle\phi)^4 + \cdots) - S_y ((\triangle\phi) - \frac{1}{3!}(\triangle\phi)^3 + \cdots)$$

$$= S_x \cos(\triangle\phi) - S_y \sin(\triangle\phi)$$

이로부터 우리는 다음의 관계를 얻는다.

$$\langle S_x \rangle_{\widetilde{\varphi}} \equiv < \widetilde{S_x} >_{\varphi} = \langle S_x \rangle_{\varphi} \cos(\triangle\phi) - \langle S_y \rangle_{\varphi} \sin(\triangle\phi)$$

마찬가지 방식으로 z-축을 중심으로 $\triangle\phi$ 만큼 회전하였을 때 y-성분 스핀 각운동량 연산자의 기댓값의 변화도 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\langle S_y \rangle_{\widetilde{\varphi}} \equiv < \widetilde{S_y} >_{\varphi} = \langle S_x \rangle_{\varphi} \sin(\triangle\phi) + \langle S_y \rangle_{\varphi} \cos(\triangle\phi)$$

그리고 z-성분 스핀 각운동량 연산자의 기댓값은 변하지 않음을 알 수 있다. 이는 스핀 각운동량 연산자의 기댓값들이 회전에 의하여 통상의 벡터처럼 변환함을 보여준다.

$$\begin{pmatrix} < \widetilde{S_x} > \\ < \widetilde{S_y} > \\ < \widetilde{S_z} > \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\triangle\phi & -\sin\triangle\phi & 0 \\ \sin\triangle\phi & \cos\triangle\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} < S_x > \\ < S_y > \\ < S_z > \end{pmatrix} = R_z(\triangle\phi) \begin{pmatrix} < S_x > \\ < S_y > \\ < S_z > \end{pmatrix} \quad .$$